

Název práce: Stochastická dynamika bublin v DNA

Autor: Bc. Vojtěch Kaiser

Katedra: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Tomáš Novotný, Ph.D.,

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt: Bubliny v DNA jsou místa, kde se vlivem tepelných či torsních vlivů otevírá dvojšroubovice DNA. Tyto bubliny jsou považovány za důležité pro termodynamiku DNA [56] a biologické procesy s DNA spojené [23, 40, 43, 49]. V článcích [38, 39] byla řešena stochastická dynamika bublin v DNA na základě Polandova-Scheragova modelu a získány analytické výsledky při teplotě denaturace DNA a pro asymptotiku dlouhých časů, zvláště pro hustotu pravděpodobnosti času setkání konců bubliny. V této práci navazujeme na tyto výsledky a počítáme celkový tvar této hustoty pravděpodobností s využitím numerické inverse analytických vztahů v Laplaceově obraze. Dále počítáme hustotu pravděpodobnosti místa setkání konců bubliny. Odpovídající výsledky jsou numericky spočteny v případě molekul DNA konečné délky. Zachycování bubliny v oblastech bohatých na AT páry je modelováno jako subdifusivní systém dle článku [42] a jsou počítány stejné veličiny jako pro difusivní model. V závěru diskutujeme tyto výsledky a možnost jejich experimentálního ověření.

Klíčová slova: bubliny v DNA, Polandův-Scheragův model, Fokkerova-Planckova rovnice, subdifuze

Title: Stochastic dynamics of DNA bubbles

Author: Bc. Vojtěch Kaiser

Department: Department of Condensed Matter Physics

Supervisor: RNDr. Tomáš Novotný, Ph.D.,

Department of Condensed Matter Physics

Abstract: DNA bubbles are local openings of the DNA double-helix caused by thermal or torsional forces. The bubbles are considered to be relevant for DNA thermodynamics [56] and DNA-related biological processes [23, 40, 43, 49]. In ref. [38, 39], the stochastic dynamics of DNA bubbles based on the Poland-Scheraga model were solved analytically at the melting temperature and for the long-time behaviour, namely the meeting-time probability density function. In this thesis, we extend these results to the description of the complete probability distributions, using analytic expressions in the Laplace picture which are inverted numerically. Further, the meeting-position probability density function is obtained. The corresponding results for dynamics in finite DNA chains are computed numerically. The case of bubble trapping in AT-rich regions close to the melting temperature is studied as a subdiffusive system, as proposed in ref. [42], and the relevant quantities are obtained. Finally, we analyse these results and discuss the feasibility of their experimental verification.

Keywords: DNA bubbles, Poland-Scheraga model, Fokker-Planck equation, subdiffusion